УДК 539.292

ПОВЕРХНОСТНЫЕ ПЛАЗМОНЫ НА ГРАНИЦЕ ДВОЙНИКОВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ

В. Н. Нишанов, С. Я. Рахманов

Исследуются поверхностные плазмоны (ПП) на границе двойникования кристаллов как частный случай границы раздела двух анизотропных сред. Сформулированы условия существования ПП. Доказано, что в одноосных кристаллах вблизи поверхности двойника ПП не существуют. В двухосных кристаллах ПП существуют в определенном диапазоне углов разворота кристаллографических осей и волновых векторов. Предсказывается появление новой ветви ПП при фазовых переходах одноосный—двухосный кристалл, которые характеризуются температурной зависимостью (вблизи критической температуры T_c) сдвига частоты (от обычного значения) $\sim(T_c-T)^{1/2}$, ширины резонанса $\sim(T-T_c)^{1/4}$.

1. Различные свойства двойников давно изучались в физике твердого тела. С появлением ВТСП интерес к двойникам проявился с новой силой в связи с их влиянием на сверхпроводящие свойства, в частности на температуру перехода [1]. Данная работа посвящена выяснению условий существования поверхностных колебаний электронной плотности (поверхностных плазмонов — ПП) в анизотропных кристаллах металлического типа, содержащих поверхности двойникования. К таким кристаллам относятся ВТСП типа 1—2—3 и др. Поверхность двойникования рассматривается как частный случай плоской границы произвольных анизотропных сред, где по обе стороны от границы находятся одинаковые среды с развернутыми кристаллографическими осями.

2. Рассмотрим контакт двух анизотропных проводящих кристаллов, кристаллографические оси которых развернуты на произвольные углы по отношению к геометрическим осям (ось OZ перпендикулярна границе, оси OX и OY лежат в плоскости границы). Спектры длинноволновых (без учета пространственной дисперсии) ПП в такой системе находятся [2] из уравнений Лапласа

$$\nabla_i(\varepsilon_{ij}\nabla_j)\Phi=0 \tag{1}$$

и условий непрерывности электростатического потенциала Φ и нормальной составляющей электрической индукции

$$\Phi\,|_{z=-0}=\Phi\,|_{z=+0},\qquad \varepsilon^{\mathrm{I}}_{zj}\nabla_j\Phi\,|_{z=-0}=\varepsilon^{\mathrm{II}}_{zj}\nabla_j\Phi\,|_{z=+0}. \tag{2}$$

Здесь $\varepsilon^{\alpha}_{ij}(\omega)$ — тензор диэлектрической проницаемости двух сред; $\alpha=\mathrm{I}$, II. В системе главных осей кристалла тензор $\varepsilon^{0\alpha}_{ij}$ имеет диагональный вид и выражается через $\omega_{i\alpha}$ — частоты плазменных колебаний вдоль соответствующих осей; $\varepsilon^{0\alpha}_{ij}(\omega)=(1-\omega^2_{i\alpha}/\omega^2)\,\delta_{ij}$. При однодолинном электронном спектре $\omega_{i\alpha}$ выражается обычным образом через анизотропные эффективные массы (в многодолинном случае суммируются вклады разных долин [3]). Тензоры $\varepsilon^{\alpha}_{ij}(\omega)$ получаются с помощью унимодулярных матриц поворота осей координат $S(\theta,\varphi,\psi)$ $(\theta,\varphi,\psi$ — углы Эйлера)

$$\varepsilon^{\alpha}_{ij}(\omega)=(S_{ik})^{-1}\,\varepsilon^{0\alpha}_{kl}S^{\alpha}_{lj}. \tag{3}$$

Фурье-преобразование (1), (2) дает дисперсионное уравнение

$$(\varkappa_2^{\mathrm{I}})^2 = (\varkappa_2^{\mathrm{II}})^2, \tag{4}$$

$\varkappa_2$ — мнимая часть z-составляющей безразмерного волнового вектора $k_z^\alpha|k_\parallel$; $k_\parallel$ — волновой вектор, лежащий в плоскости,

$$(\varkappa_2^\alpha)^2 = -(\omega^4 - u_\alpha\omega^2 + v_\alpha)/\omega^4, \tag{5}$$

где

$$u_\alpha = \omega_{1\alpha}^2 + \omega_{2\alpha}^2 + \omega_{3\alpha}^2 - \omega_{3\alpha}^2 A_{12}^\alpha - \omega_{2\alpha}^2 A_{13}^\alpha - \omega_{1\alpha}^2 A_{23}^\alpha,$$

$$v_\alpha = \omega_{1\alpha}^2\omega_{2\alpha}^2\omega_{3\alpha}^2 [A_{12}^\alpha/\omega_{3\alpha}^2 + A_{13}^\alpha/\omega_{2\alpha}^2 + A_{23}^\alpha/\omega_{1\alpha}^2],$$

$$A_{ij}^\alpha = \{[(S_{1i}^\alpha)^{-1} S_{j3}^\alpha - (S_{1i}^\alpha)^{-1} S_{j1}^\alpha]\tilde{k}_1 + [(S_{2i}^\alpha)^{-1} S_{j3}^\alpha - (S_{3i}^\alpha)^{-1} S_{j2}^\alpha]\tilde{k}_2\}^2,$$

$$\tilde{k}_1 = k_x/k_{\mathrm{II}}, \quad \tilde{k}_2 = k_y/k_{\mathrm{II}}.$$

Существование тождества $A_{12}^\alpha + A_{13}^\alpha + A_{23}^\alpha = 1$ приводит к тому, что дисперсионное уравнение (4) линейно по ω^2

$$\omega^2 = (v_{\mathrm{II}} - v_{\mathrm{I}})/(u_{\mathrm{II}} - u_{\mathrm{I}}). \tag{6}$$

Критерий существования ПП можно представить в виде двух неравенств

$$(v_{\mathrm{II}} - v_{\mathrm{I}})/(u_{\mathrm{II}} - u_{\mathrm{I}}) > 0, \tag{7}$$

$$\left(\frac{v_{\mathrm{II}} - v_{\mathrm{I}}}{u_{\mathrm{II}} - u_{\mathrm{I}}}\right)^2 - u_{\mathrm{I}}\left(\frac{v_{\mathrm{II}} - v_{\mathrm{I}}}{u_{\mathrm{II}} - u_{\mathrm{I}}}\right) + v_{\mathrm{I}} > 0. \tag{8}$$

Так как независимых параметров четыре, а условий два, то для любого поворота одной среды, по-видимому, можно подобрать такой диапазон углов поворота другой среды, что ПП будут существовать.

3. Если граница раздела есть поверхность двойникования кристалла, сре́ды справа и слева отличаются поворотом тензора ε_{ij}^α. В этом случае уравнение (6) имеет вид

$$\omega^2 = (\omega_2^2 + \omega_3^2\gamma\tilde{A}_{13}/\tilde{A}_{12})/(1+\gamma\tilde{A}_{13}/\tilde{A}_{12}), \quad \gamma = (\omega_2^2 - \omega_1^2)/(\omega_3^2 - \omega_1^2), \quad \tilde{A}_{ij} = A_{ij}^{(1)} - A_{ij}^{(2)}. \tag{9}$$

Без потери общности можно положить

$$\omega_1^2 < \omega_2^2 < \omega_3^2,$$

тогда $0 < \gamma < 1$. Построим график ω^2 как функции отношения коэффициентов, зависящих от углов поворота двух блоков, $\tilde{A}_{13}|\tilde{A}_{12}$ (см. рисунок). Видно, что ω^2 пробегает весь диапазон значений от $-\infty$ до $+\infty$. Первое условие существования ПП $\omega^2 > 0$ выполняется, когда $\tilde{A}_{13}|\tilde{A}_{12} > -\omega_2^2\gamma/\omega_3^2$ или $\tilde{A}_{13}/\tilde{A}_{12} < -1/\gamma$. Второе условие (необходимое и достаточное) $\varkappa_2^2 < 0$ выполняется всегда, если $\omega^2 > \omega_3^2$ или $\omega^2 < \omega_1^2$. Если $\omega_1^2 \leqslant \omega^2 \leqslant \omega_3^2$, то выделить область углов поворота и продольных векторов $\tilde{k}_1$ и $\tilde{k}_2$, в которой существуют ПП, в общем виде не представляется возможным. Поэтому в каждом конкретном случае следует воспользоваться критерием (8).

Исключение составляют одноосные кристаллы (у которых различаются только две компоненты тензора ε_{ii}^0). Для них легко показать в общем виде, что на поверхности двойника ПП отсутствуют. Полагая в (9) равными две любые плазменные частоты, получим, что ω равно вырожденному значению плазменной частоты, а $\varkappa_2^2 \equiv 0$, т. е. ПП не существуют.

Для двухосных кристаллов разберем некоторые частные случаи.

4. Рассмотрим двухосный кристалл, близкий к одноосному. Пусть

$$\omega_2^2 = \omega_1^2 + \Delta, \tag{10}$$

где $\Delta \ll \omega_1^2$. Раскладывая (9) по малому параметру $\Delta\tilde{A}_{13}/\omega_1^2\tilde{A}_{12}$, получим

$$\omega^2 = \omega_1^2 + \Delta(1 + \tilde{A}_{13}/\tilde{A}_{12}). \tag{11}$$

Из (5) найдем

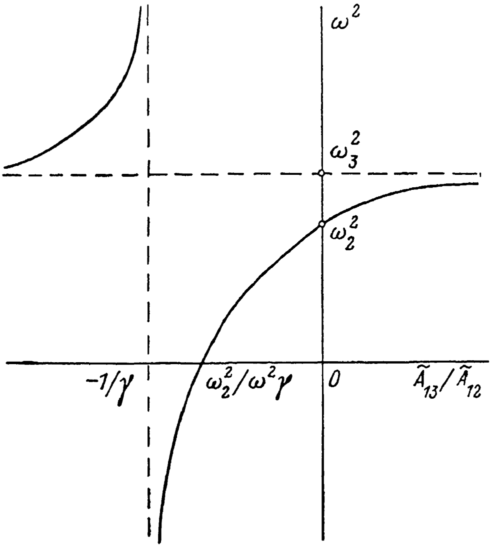
$$\varkappa^2 = \frac{1}{\omega_1^4}(\omega_3^2-\omega_1^2)\Delta\left[A_{12}^{\mathrm{I}} + \frac{\tilde{A}_{13}}{\tilde{A}_{12}}(A_{12}^{\mathrm{I}}+A_{13}^{\mathrm{I}})\right]. \tag{12}$$

Знак $\varkappa^2$ может быть любой, в зависимости от значения $\tilde{A}_{13}/\tilde{A}_{12}$. Поэтому ПП существуют в определенном диапазоне углов и k. Появление моды ПП при структурных фазовых переходах одноосный—двухосный кристалл (например, кристаллы ВТСП со структурой 1—2—3 претерпевают переход из тетрагональной (одноосной) фазы в орторомбическую (двухосную) фазу) может служить одним из методов индикации этого перехода. Если фазовый переход является переходом второго рода, то вблизи критической температуры фазового перехода

$$\Delta \sim (T_c - T)^{1/2}, \tag{13}$$

что легко получается разложением ω_i^2 по параметру порядка — изменению периода решетки. Для декремента пространственного затухания $q = |\varkappa|k_{\parallel}$ справедливо выражение

$$q \sim (T_c - T)^{1/4}k_{\parallel}. \tag{14}$$



Зависимость квадрата частоты ПП ω^2 от приведенного углового параметра $\tilde{A}_{13}/\tilde{A}_{12}$.

Ширина резонанса ПП Г связана с декрементом пространственного затухания [4, 5] соотношением

$$\Gamma \approx v_F q \sim (T_c - T)^{1/4}, \tag{15}$$

где v_F — скорость электронов на поверхности Ферми.

5. Здесь будут описаны двойниковые границы с определенными углами поворотов, наиболее часто встречающиеся в практике роста кристаллов. Будем считать, что матрица поворотов зависит только от двух углов: θ — угол поворота в плоскости YZ, φ — угол поворота в плоскости XY. Рассмотрим частные случаи, а именно поворот осей кристалла на 90° при переходе через плоскость двойникования и симметричные двойники.

а) В правом полупространстве $z > 0$ геометрические оси совпадают с главными осями кристалла, $\varphi'=0$, $\theta'=0$, а в левом полупространстве оси переименованы, $\theta=90°$, $\varphi=0$. В этом случае из (5), (9) находим

$$\omega^2 = \omega_2^2, \quad \varkappa_2^2 = (\omega_3^2-\omega_2^2)(\omega_2^2-\omega_1^2)/\omega_2^4. \tag{16}$$

Очевидно, что $\varkappa_2^2 < 0$, если $\omega_2^2 < \omega_1^2 < \omega_3^2$ или $\omega_3^2 < \omega_1^2 < \omega_2^2$. Если $\omega_1^2 < \omega_2^2 < \omega_3^2$, поверхностных плазмонов нет. (Поворот на два угла θ и φ не есть поворот общего вида, поэтому нельзя утверждать, что $\omega_1^2 < \omega_2^2 < \omega_3^2$).

б) $\theta=0$, $\varphi=90°$. В этом случае $\omega=\omega_3$, $k_z^2=0$. Поверхностных плазмонов нет.

в) $\theta=90°$, $\varphi=90°$,

$$\omega = \omega_2, \quad k_z^2 = \frac{(\omega_3^2-\omega_2^2)(\omega_2^2-\omega_1^2)}{\omega_2^4}k_{\parallel}^2. \tag{17}$$

Поверхностные плазмоны существуют, если $\omega_2^2 < \omega_1^2 < \omega_3^2$ или $\omega_3^2 < \omega_1^2 < \omega_2^2$.

г) Рассмотрим случай зеркального двойника, когда в смежных средах собственные оси кристаллов повернуты относительно нормали на симметричные углы, $\theta=\pi-\theta'$. Если $\varphi'=0$, $\varphi=0$, то дисперсионное уравнение обращается в тождество, ПП отсутствуют, объемные плазмоны не отражаются на границе. Если $\varphi=\varphi'\neq 0$, $\omega=\omega_3$, $\tilde{k}_z=0$, ПП также отсутствуют.

6. Проведенное выше рассмотрение показывает, что поверхностные электронные свойства вблизи границы двойникования представляют собой довольно богатую картину. Так, ПП в одноосных кристаллах ни при каких условиях не могут существовать. В двухосных кристаллах ПП существуют в определенном диапазоне углов разворота блоков относительно границы двойникования и волновых векторов (см. рисунок). Особый интерес представляет фазовый переход одноосный—двухосный кристалл, так как в этом случае вблизи точки фазового перехода появляется новая ветвь ПП, у которой в отличие от обычных поверхностных и объемных плазмонов частота и ширина резонанса зависят от температуры. По этой температурной зависимости можно идентифицировать ПП на границе двойника и с их помощью исследовать структурные свойства кристаллов.

Авторы выражают благодарность Л. Н. Булаевскому, Д. А. Киржницу и А. А. Собянину за обсуждения и интерес к работе.

Список литературы

[1] Хлюстиков И. Н., Буздин А. И. // УФН. 1988. Т. 155. № 1. С. 47—88.
[2] Агранович В. М., Гинзбург В. Л. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. М., 1979. 374 с.
[3] Плацман С., Вольф П. Рассеяние света в твердом теле. М., 1975. 380 с.
[4] Мусин Д. Р., Нишанов В. Н. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 12. С. 3713—3716.
[5] Нишанов В. Н., Хабибуллаев П. К. // ДАН СССР. 1987. Т. 293. № 6. С. 1369—1374.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
13 июня 1989 г.
В окончательной редакции
8 февраля 1990 г.